

2009 年度 修士論文要旨

ベイジアンネットワークによる化学物質の 毒性予測システムの構築

関西学院大学大学院理工学研究科
情報科学専攻 岡田研究室 山口 一步

現在、生産された化学物質に対して動物実験を行い、毒性学的性状を明確化することが法律でさだめられている。化学物質の毒性は、動物試験によって得られた膨大な実測試験データを基に評価する。これには既知の物質の作用や生体内における代謝に関する知識等による総合的な判断をすることが必須である。

本研究の目的は、化学物質の毒性を既知の周辺情報を基に、科学者が的確かつ効率よく評価できるシステムの構築である。そのために、化学物質の血液・肝臓への毒性を対象としたベイジアンネットワークモデルを構築した。しかし、一般的にベイジアンネットワークモデルを構築する際には、その因果関係に関する専門家であっても、適切な条件付確率の入力を行うことは非常に困難であるという問題がある。

本研究においても、化学物質の毒性という生体内で起こる不確かな現象を扱っているため、同様の問題が発生する。そこで、この問題を解決するために、Conflict Analysis と Sensitivity Analysis を用いた。

本研究においても、化学物質の毒性という生体内で起こる不確かな現象を扱っているため、同様の問題が発生する。そこで、この問題を解決するために、Conflict Analysis と Sensitivity Analysis を用いた。Conflict Analysis とは、確率推論を行った結果から、条件付き確率表で表現される前提知識と整合する合理的な path と、前提知識と矛盾する非合理的な path を検出する分析手法である。また、Sensitivity Analysis とは、どの条件付き確率を更新すれば、尤もらしい値を入力できるかを計算する分析手法である。これらの手法を用いることによって、化学物質の毒性を科学者にとって分かりやすいように表現することができた。

また、Conflict Analysis を用いて、科学者に毒性予測結果を提示するための GUI を開発することで、科学者にとって一目で予測結果を理解でき、その周辺情報を得ることができるようになった。